競合的三角格子磁性体の磁性(磁性体における新しいタイプの相転移現象,研究会報告)

AUTHOR(S):

川崎, 和子

競合的三角格子磁性体の磁性

奈良女子大学　理学部　川崎和子

最隣接スピン間に反強磁性相互作用 J_1 を持つ三角格子磁性体は、結晶の対称性よりフラストレーションの効果が顕著であることが知られている。この系の第二隣接スピン間に強磁性相互作用 J_2 があり、互いに競合する二種類の相互作用が存在するとき、あるいは、非磁性原子がランダムに配列している場合、フラストレーションの効果の変化を調べることは、磁性体の臨界現象を考察する上で興味のある問題である。

ここでは、モデルとして、非磁性原子がランダムに配列した site dilution を持つフェニナ系を考える。磁性原子のスピン間には、第一隣接には、反強磁性相互作用 J_1 があり、第二隣接間には強磁性相互作用 J_2 があるものとすると、系の Hamiltonian は、ハイゼンベルグスピン系の場合

$$H = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle}^{n.n} c_i c_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J_2 \sum_{\langle ij \rangle}^{n.n.n} c_i c_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \qquad (1)$$

である。(1)式において、c_i は magnetic site occupation を表わす演算子で site i に磁性原子が存在するときは 1，他の場合は零である。従って磁気濃度 c は次式で与えられる。

$$\sum_i c_i = Nc \quad , \quad c_i^2 = c_i \quad , \quad c_i c_j = c_j c_i \qquad (2)$$

いま、系の基本ベクトルを格子定数 d として $\vec{a} = (d/2, \sqrt{3}\,d/2)$, $\vec{b} = (d, 0)$ ととると，逆格子ベクトルは $\vec{k}_a = (2\pi/d, -2\pi/\sqrt{3}\,d)$, $\vec{k}_b = (0, 4\pi/\sqrt{3}\,d)$ である。

この系の近距離秩序 (S.R.O) の振舞いについて、エントロピー $S(T)$ と波数依存性を持つ相関々数 $\langle S_{\vec{k}}^{z} S_{-\vec{k}}^{z} \rangle$ を高温展開の方法により、前者については $\beta(\equiv 1/kT)$ の 6 次，後者については 5 次迄計算することにより解析する。

(i) エントロピー

三角格子としての特徴を捉える為には、他の結晶構造との比較が重要になる。磁気濃度 $c=1.0$ と 0.6 の場合について、次の 4 種類の格子系についてエントロピーを計算した。

(1) 三角格子反強磁性体　$J_1=1.0$, $J_2=0$

(2) 互いに競合する二種類の相互作用が存在する三角格子 $J_1=1.0$, $J_2=0.2$

(3) 同じ二次元系ではあるがフラストレーションの無い正方格子 $J_1=1.0$, $J_2=0$

(4) 平面内は三角格子反強磁性体であるが、面間に強磁性相互作用 J_2 を

持つ六方晶格子　$J_1=1$,　$J_2=0.2$

いずれの場合も，エントロピーは温度の低下に伴なって単調へ減少する。

そこでエントロピーに関する量

$$\tilde{S}(T) = [S(\infty) - S(T)] / N k_B \delta_2 \beta^2$$

但し
$$\delta_2 = 2X^2c^2(J_1^2 + J_2^2) \qquad \text{三角格子の場合}$$
$$= (2/3)X^2c^2(3J_1^2 + J_2^2) \qquad \text{六方晶格子の場合}$$
$$= (4/3)X^2c^2 J_1^2 \qquad \text{正方格子の場合}$$

$$X = S(S+1)/3$$

を計算することにより，磁気濃度すなわちランダムネス，競合する相互作用の存在及び結晶構造による S.R.O の温度依存性における相異を調べる。

Square Lattice

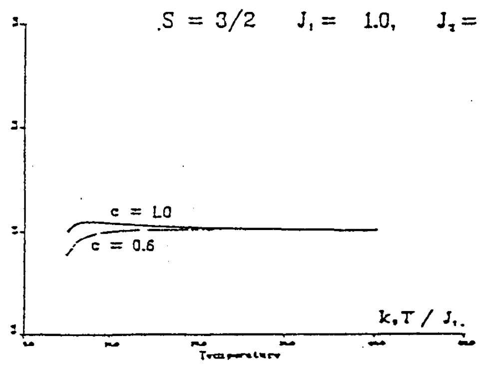

図 1 (a)

Triangular Lattice

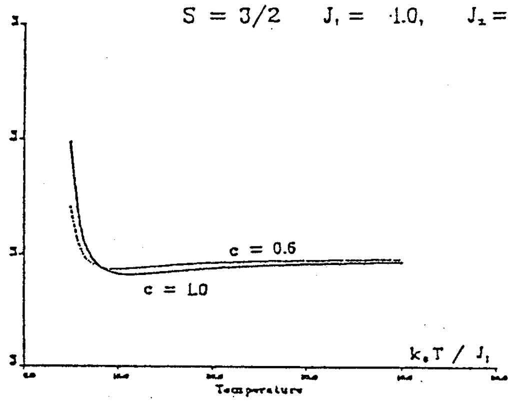

図 1 (c)

Triangular Lattice

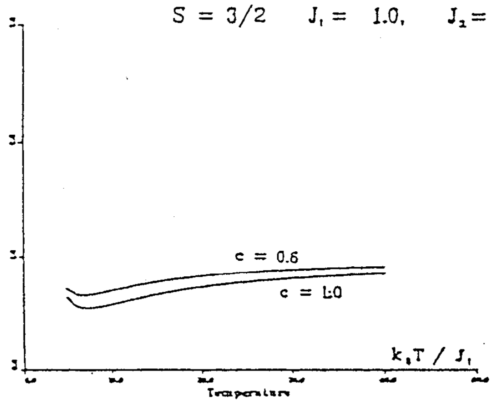

図 1 (b)

Hexagonal Lattice

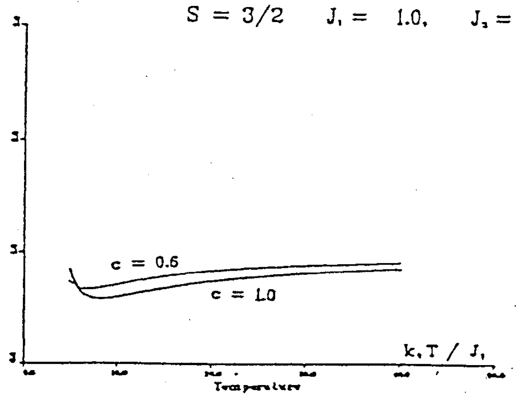

図 1 (d)

フラストレーションのない正方格子では（図1(a)）$\tilde{S}(T)$ は C=1.0 の場合が C=0.6 の場合よりも大きく、非磁性原子の存在は S.R.O の発達をおさえている。ところが一方、三角格子系では、濃度依存性は逆の傾向を示し（図1(b)）、これは非磁性原子の存在がフラストレーション効果を弱めエントロピーの減少をうながすものとみられる。三角格子系でも、反強磁性結合と競合する強磁性相互作用が存在すると、やはりフラストレーションの効果は相対的に減少させられることが図1(b)と(c)を比較することにより明らかになる。

(iii) k-dependent 相関々数 $\langle S_k^c S_{-k}^c \rangle$

$\langle S_k^c S_{-k}^c \rangle$ は g site にあるスピン S_g と p site にあるスピン S_p の相関々数

$$\langle S_g^c S_p^c \rangle = \sum_{\{c\}} \langle c_g S_g^c c_p S_p^c \rangle_{configuration}$$

をフーリエ変換することによって得られる。

$\langle S_k^c S_{-k}^c \rangle$ を $(4\pi/\sqrt{3})$ を単位にとって $\vec{k}_b$ 方向にみた場合、C=1.0 について図2(a)、C=0.6 について図2(b) に示した。但し相関々数の値は T=∞ での値で規格したものである。図中、温度を表わすパラメーター k_BT/J の J は、J_1 と J_2 の値の内大きい方の値を取るものとする。

$J_1=1$, $J_2=0$ が最もフラストレーションの効果が大きい場合であるが、C=0.6 では反強磁性の典型的な振舞い、すなわち k=0 から単調に増加し zone boundary で最大値を示しているが、C=1.0 の k-依存性は必ずしも単調ではなく振動的に変化する様子がみられる。J_2 の導入により強磁性的な傾向が現われ、特に $J_1=J_2=1$ の場合は $k_b=0.5$ の点に関して対称的な変化をしている。

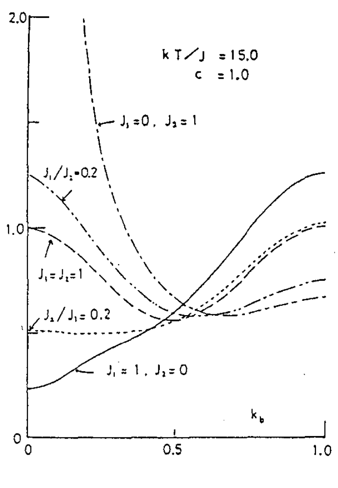

図2(a)

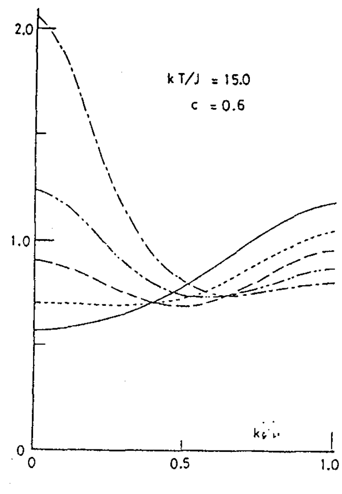

図2(b)